

Инкапсулирование углеродных нанотрубок типа «кресло» цепочкой атомов Fe «зигзаг»

В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю.Г. Пашкевич

*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины
пр. Науки, 46, г. Киев, 03039, Украина
E-mail: shev@fti.dn.ua*

Статья поступила в редакцию 14 декабря 2015 г., опубликована онлайн 23 марта 2016 г.

В рамках теории функционала плотности проведены неэмпирические расчеты структурных, электронных и магнитных свойств углеродных нанотрубок (НТ) типа «кресло», инкапсулированных цепочкой атомов Fe «зигзаг» $\text{Fe}_2@(n,n)_m$ ($m = 1, 2; n = 4, 5, 6, 7, 8, 9$). Показано, что оптимизация структуры вдоль оси НТ может существенно изменить энергию связи НТ и цепочки атомов Fe. Из расчетов следует, что $\text{Fe}_2@(5,5)$ — наиболее стабильна из всех исследуемых инкапсулированных нанотрубок. Уменьшение концентрации Fe в инкапсулированной НТ в два раза переводит систему из экзотермической в эндотермическую ($\text{Fe}_2@(5,5)_m$) и наоборот ($\text{Fe}_2@(6,6)_m$). При больших радиусах инкапсулированной НТ ($> 4,13 \text{ \AA}$) энергия связи НТ и цепочки атомов Fe стремится к нулю, а магнитные моменты атомов Fe и отклонения атомов Fe от оси НТ стремятся к значениям аналогичных величин в свободной цепочке атомов Fe «зигзаг».

В рамках теорії функціонала щільності проведено неемпіричні розрахунки структурних, електронних та магнітних властивостей карбонових нанотрубок (НТ) типу «крісло», інкапсульованих ланцюжком атомів Fe типу «зигзаг» $\text{Fe}_2@(n,n)_m$ ($m = 1, 2; n = 4, 5, 6, 7, 8, 9$). Показано, що оптимізація структури вздовж осі НТ може істотно змінити енергію зв'язку НТ та ланцюжка атомів Fe. З розрахунків випливає, що $\text{Fe}_2@(5,5)$ — найбільш стабільна з усіх інкапсульованих нанотрубок, які нами розраховувались. Зменшення концентрації Fe в інкапсульованій НТ у два рази переводить систему з екзотермічної в эндотермічну ($\text{Fe}_2@(5,5)_m$) та навпаки ($\text{Fe}_2@(6,6)_m$). При більших радіусах інкапсульованої НТ ($> 4,13 \text{ \AA}$) енергія зв'язку НТ та ланцюжка атомів Fe прямує до нуля, а магнітні моменти атомів Fe та відхилення атомів Fe від осі НТ наближаються до значень аналогічних величин в окремому ланцюжку атомів Fe «зигзаг».

PACS: 71.20.Tx Фуллерены и подобные материалы, интеркалированные соединения;
73.22.-f Электронная структура наноразмерных материалов и других связанных с ними систем;
61.48.De Структура углеродных нанотрубок, борсодержащих нанотрубок и других связанных с ними систем.

Ключевые слова: электронная структура, углеродная нанотрубка «кресло», инкапсулирование, цепочка атомов железа «зигзаг», энергия связи, магнитный момент железа.

Введение

В последнее время нанопровода переходных металлов привлекают повышенное внимание исследователей, поскольку их уникальные свойства предполагают широкое применение данных объектов во многих областях современных нанотехнологий: спинтронике, магнитной записи, высокочувствительных магнитных сенсорах [1–3]. Нанопровода переходных металлов интенсивно изучаются лабораторными методами [4–10]. Из теоретических исследований отметим первопринципные расчеты свободных нанопроводов переходных металлов [11–14]. Немало работ посвящено проблеме

взаимодействия нанопроводов с кристаллической подложкой [15,16]. Однако чаще всего рассматриваются нанопровода переходных металлов, находящиеся внутри углеродных нанотрубок (НТ) [17–27]. Это связано с тем, что углеродная оболочка защищает нанопровод от внешних воздействий. Следует заметить, что провести подобные расчеты корректно довольно сложно, поскольку в общем случае постоянные решетки вдоль оси трансляции углеродной НТ и нанопровода металла несоизмеримы.

Простейший нанопровод — линейная цепочка атомов. Изучению магнитных и электронных свойств углеродных НТ, инкапсулированных линейной цепочкой

атомов переходных металлов, посвящено несколько исследований [23–27]. Но в обстоятельной работе [28] показано, что, по крайней мере, для 3*d*-переходных металлов энергетически существенно более выгодна зигзагообразная форма цепочки атомов. Выбор для исследования цепочки атомов «зигзаг» конкретно атомов Fe определяется тем, что железо — наиболее распространенный катализатор роста углеродных НТ. Кроме того, постоянная решетки вдоль оси трансляции моноатомного нанопровода «зигзаг» Fe довольно близка к постоянной решетки углеродных НТ типа «кресло» — (*n, n*). Таким образом, следует ожидать, что при экспериментальной реализации заполнения НТ атомами железа более вероятным будет возникновение цепочек железа типа «зигзаг». Этим определяется выбор для расчетов именно таких углеродных НТ.

Целью настоящей работы является исследование структурных, электронных и магнитных свойств углеродных НТ типа «кресло», инкапсулированных цепочкой атомов Fe «зигзаг» Fe₂@(*n, n*)_{*m*}. Будут рассмотрены нанотрубки с *n* = 4, 5, 6, 7, 8, 9 и разной степенью заполнения железом (*m* = 1, 2). Особое внимание будет уделено энергии связи НТ и цепочки Fe.

Метод расчета

Электронное строение одномерных наноструктур рассчитывалось в рамках теории функционала плотности методом проекционных присоединенных волн (PAW) [29], программный пакет VASP (Vienna *ab initio* simulation package) [30]. Для обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщенное градиентное приближение (generalized gradient approximation (GGA)) в виде, предложенном Perdew–Burke–Ernzenhof [31]. В качестве псевдопотенциалов использовали стандартные псевдопотенциалы VASP. Число разбиений при интегрировании по неприводимой части зоны Бриллюэна в расчетах выбиралось равным 36, а использованный максимальный волновой вектор в наборе плоских волн соответствует энергии 400 эВ. В результате проведения самосогласованных расчетов находили оптимизированные позиции всех атомов и полную энергию системы, а затем рассчитывали зонную структуру соединения, плотность электронных и спиновых состояний и т.д. При оптимизации выполнялось требование, чтобы силы, действующие на атомы, были меньше, чем 0,02 эВ/Å. Атомы Fe соседних НТ находятся на расстоянии не менее 14 Å, поэтому их взаимодействием можно пренебречь.

Цепочка атомов Fe «зигзаг»

На рис. 1 схематично изображены цепочки атомов: линейная и «зигзаг». Постоянная решетки вдоль оси трансляции нанопровода d_0 для линейной ферромагнитной цепочки атомов Fe равна 2,28 Å (равновесное

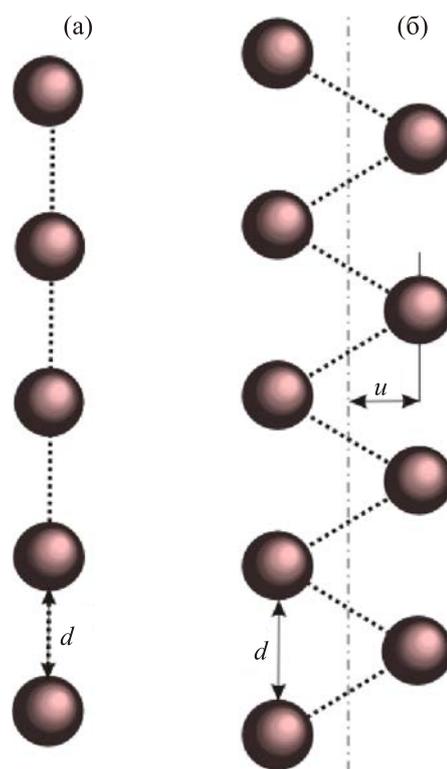


Рис. 1. Схематическое изображение цепочки атомов Fe: линейная цепочка (а), цепочка «зигзаг» (б).

расстояние между атомами, отвечающее минимальной энергии). В элементарной ячейке находится один атом Fe. Энергия связи E_b между атомами Fe, приходящаяся на один атом, равна –2,03 эВ. Отрицательное значение E_b означает, что состояние связанное.

В элементарной ячейке ферромагнитной цепочки «зигзаг» два атома Fe. Геометрическими характеристиками в этом случае являются период решетки d и величина отклонения атомов железа от оси цепочки u . На рис. 2 приведена зависимость энергии связи E_b от постоянной решетки d вдоль оси цепочки атомов Fe «зигзаг». Здесь же показано отклонение атома Fe u от оси нанопровода в зависимости от d . Минимум энергии для ферромагнитной цепочки атомов Fe «зигзаг» достигается при значении d_0 , равном 2,54 Å. При этом энергия связи E_b , приходящаяся на один атом Fe, равна –3,017 эВ. То есть связь в случае цепочки атомов «зигзаг» существенно более прочная. В минимуме энергии отклонения u по абсолютной величине достаточно значительны и составляют $u_0 = 1,05$ Å. Увеличение энергии связи по сравнению с таковой для линейной цепочки обусловлено тем, что в этом случае каждый атом железа фактически имеет четыре ближайших соседа (два атома на расстоянии 2,54 Å и два атома на расстоянии 2,45 Å). При увеличении периода решетки цепочка как бы выпрямляется, отклонение u монотонно падает и при $d = 4,8$ Å отклонение атомов Fe u от оси нанопровода становится равным нулю. Из прове-

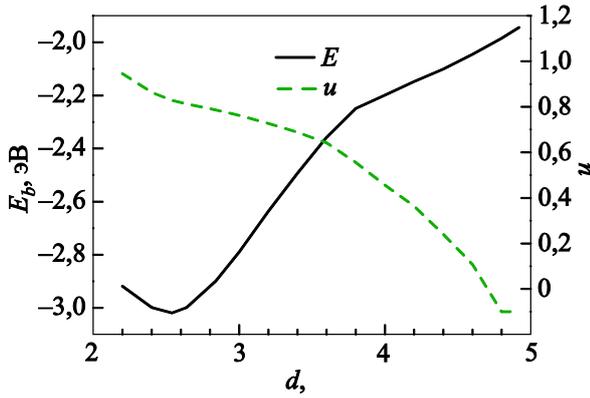


Рис. 2. Зависимость энергии связи E_b и отклонения атома Fe от постоянной решетки цепочки атомов Fe «зигзаг» d .

денного анализа следует, что для НТ, инкапсулированных цепочкой атомов переходных металлов, энергетически выгодно состояние цепочки в форме «зигзаг».

Из всех углеродных НТ структура типа «кресло» (хиральные индексы (n,n)) наиболее подходит для размещения цепочки атомов Fe типа «зигзаг». Действительно, в этом случае постоянная решетки c_0 вдоль оси трансляции для всех углеродных НТ «кресло» одинакова и равна $2,4595 \text{ \AA}$, тогда как различие в постоянных решетках для составляющих общую структуру углеродной НТ и цепочки атомов Fe ($2,4595$ и $2,54 \text{ \AA}$) составляет менее $3,3\%$.

Fe₂@(n,n). Результаты и обсуждение

Энергия связи НТ и цепочки атомов железа определяется следующим образом:

$$E_b = \frac{E^{\text{NT+Fe}} - E^{\text{NT}}}{N_{\text{Fe}}} - E^{\text{Fe}},$$

где $E^{\text{NT+Fe}}$ — энергия ферромагнитного состояния НТ, инкапсулированной цепочкой атомов железа; E^{NT} — энергия свободной НТ; N_{Fe} — количество атомов Fe, приходящееся на одну элементарную ячейку; E^{Fe} — энергия свободной ферромагнитной цепочки атомов железа, приходящаяся на один атом Fe.

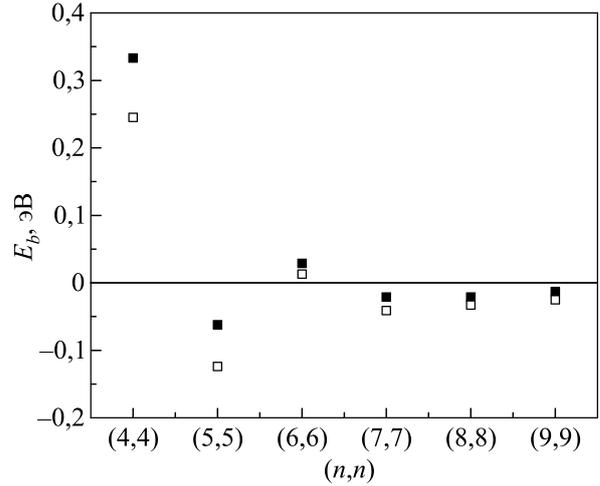


Рис. 3. Зависимость энергии связи E_b от радиуса R для инкапсулированных НТ Fe₂@(n,n). (■) — постоянная решетки c_0 ; (□) — после оптимизации по c .

Для уточнения значений энергий связи E_b была проведена процедура оптимизации структуры по постоянной решетки c вдоль оси НТ, т.е. при различных c выполнено несколько расчетов энергий связи и найдено минимальное значение E_b . На рис. 3 хорошо видно, что оптимизация по c существенно улучшает энергию связи для небольших радиусов инкапсулированных НТ. Так, для соединения Fe₂@(4,4) энергия связи понизилась на $0,088 \text{ эВ}$, а для Fe₂@(5,5) энергия связи изменилась в два раза, от $-0,062 \text{ эВ}$ до $-0,124 \text{ эВ}$.

При больших радиусах ($R > 4,8 \text{ \AA}$) инкапсулированных НТ энергия связи как исходных, так и оптимизированных структур с увеличением радиуса постепенно уменьшается и становится незначительной (несколько сотых электронвольт). Это и понятно, при больших расстояниях между НТ и нанопроводом энергия связи должна стремиться к нулю, так как взаимодействие между НТ и цепочкой Fe в таком случае становится ничтожно малым.

В табл. 1 приведены основные результаты неэмпирического расчета оптимизированных НТ Fe₂@(n,n). Близость атома Fe₁ к поверхности НТ из-за большого отклонения u_1 уменьшает магнитный момент и даже

Таблица 1. Структурные, электронные и магнитные характеристики оптимизированной структуры Fe₂@(n,n)

Структура	c/c_0	$R, \text{ \AA}$	m_1	m_2	u_1	u_2	E_b
Fe ₂ @(4,4)	1,02	2,82	-0,15	2,17	1,098	0,887	+0,245
Fe ₂ @(5,5)	1,01	3,45	2,61	2,61	1,071	1,071	-0,124
Fe ₂ @(6,6)	1,0025	4,13	2,87	2,87	0,945	0,945	+0,013
Fe ₂ @(7,7)	1,005	4,80	2,88	2,88	0,947	0,947	-0,041
Fe ₂ @(8,8)	1,005	5,47	2,88	2,88	0,950	0,950	-0,033
Fe ₂ @(9,9)	1,005	6,16	2,88	2,88	0,953	0,953	-0,025
Fe ₂	1,00		2,90	2,90	0,953	0,953	

Примечание: c — постоянная решетки вдоль оси НТ, в относительных единицах; R — средний радиус инкапсулированной цепочкой атомов железа НТ, в \AA ; m_i — магнитный момент на атоме Fe_{*i*}, в единицах μ_B ; u_i — отклонение от оси НТ атома Fe_{*i*}, в \AA

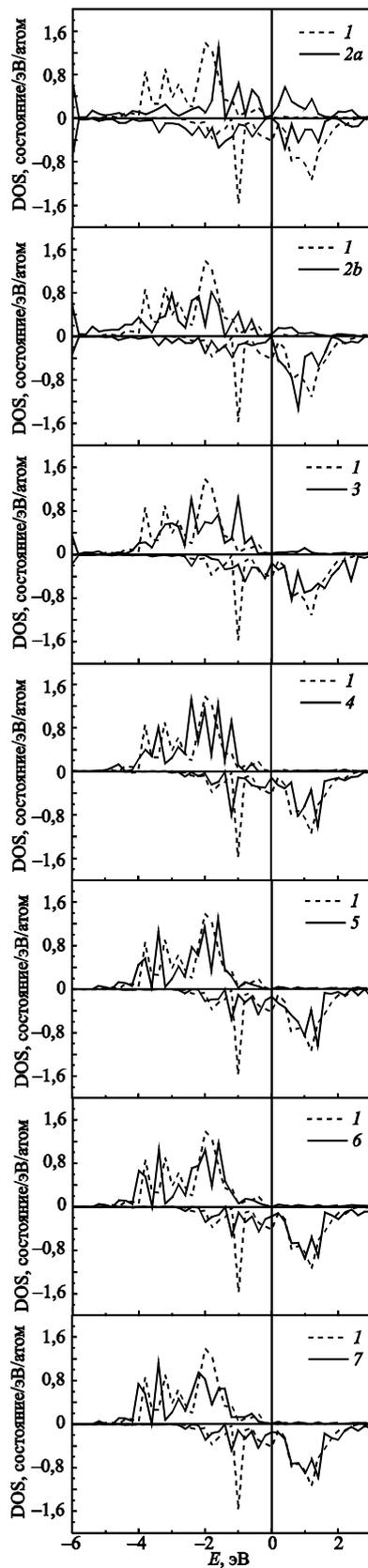


Рис. 4. Полная плотность d -состояний атома Fe в различных структурах: 1 — Fe_2 ; 2a — Fe_1 в $\text{Fe}_2@(4,4)$; 2b — Fe_2 в $\text{Fe}_2@(4,4)$; 3 — атомов Fe в $\text{Fe}_2@(5,5)$; 4 — $\text{Fe}_2@(6,6)$; 5 — $\text{Fe}_2@(7,7)$; 6 — $\text{Fe}_2@(8,8)$; 7 — $\text{Fe}_2@(9,9)$.

делает его противоположно направленным по отношению к моменту Fe_2 для структуры $\text{Fe}_2@(4,4)$. Следующая НТ $\text{Fe}_2@(5,5)$ выделяется своими характеристиками: значительным магнитным моментом, составляющим 90% от максимально возможного; большим отклонением атомов Fe от оси НТ и максимальной энергией связи. Начиная со структуры $\text{Fe}_2@(6,6)$, магнитные моменты и отклонения атомов Fe очень близки к таким же характеристикам атомов Fe цепочки «зигзаг» (последняя строчка в табл. 1). Это еще раз показывает, что взаимодействие между НТ и цепочкой Fe при радиусе НТ больше $4,13 \text{ \AA}$ становится слабым.

Плотность d -состояний Fe для всех исследуемых структур представлена на рис. 4. Существенное расширение энергетического интервала d -состояний Fe в структуре $\text{Fe}_2@(4,4)$ по сравнению с d -состояниями Fe в свободной цепочке железа «зигзаг» (рис. 4, 2(a), (б)) свидетельствует о сильной sd - и в особенности pd -гибридизации электронов НТ и нанопровода. Обращают на себя внимание и различия в плотности d -состояний Fe_1 и Fe_2 НТ $\text{Fe}_2@(4,4)$. Для остальных рассматриваемых структур плотности d -состояний Fe_1 и Fe_2 одинаковы. Гибридизация s -, p -электронов углерода с d электронами Fe в более ослабленном варианте, чем для $\text{Fe}_2@(4,4)$, характерна и для соединения $\text{Fe}_2@(5,5)$ (рис. 4, 3). Для остальных структур гибридизация электронов НТ и нанопровода Fe практически отсутствует, но даже для НТ с наибольшим радиусом $\text{Fe}_2@(9,9)$ плотности d -состояний Fe инкапсулированной НТ и свободного нанопровода не идентичны. Это связано в первую очередь с различной симметрией этих структур.

$\text{Fe}_2@(n,n)_2$. Результаты и обсуждение

Еще одна возможность согласования постоянных решетки НТ «кресло» и железной цепочки типа «зигзаг» возникает при уменьшении концентрации атомов железа в два раза. В этом случае геометрический пара-

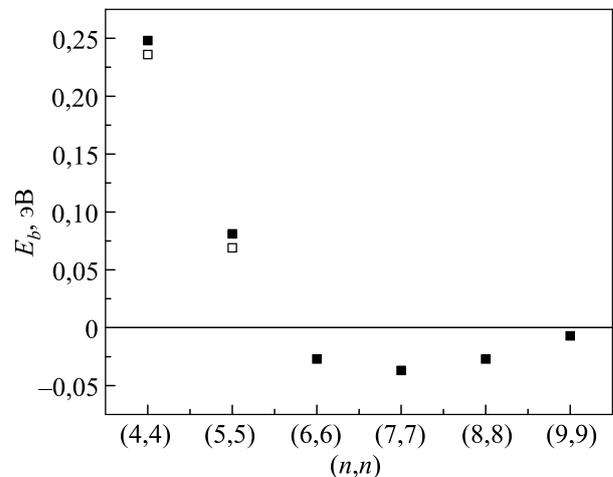


Рис. 5. Зависимость энергии связи E_b от радиуса R для инкапсулированных НТ $\text{Fe}_2@(n,n)_2$. (■) — постоянная решетки c_0 ; (□) — после оптимизации по c .

Таблица 2. Структурные, электронные и магнитные характеристики оптимизированной структуры $Fe_2@(n,n)_2$

Структура	$c/(2c_0)$	$R, \text{Å}$	m_1	m_2	u_1	u_2	E_b
$Fe_2@(4,4)_2$	1,005	2,78	2,75	2,75	0,618	0,618	+0,236
$Fe_2@(5,5)_2$	1,0025	3,46	3,16	3,16	0,243	0,243	+0,069
$Fe_2@(6,6)_2$	1,00	4,12	3,10	3,10	0,015	0,015	-0,027
$Fe_2@(7,7)_2$	1,00	4,81	3,09	3,09	0,005	0,005	-0,037
$Fe_2@(8,8)_2$	1,00	5,48	3,08	3,08	0	0	-0,027
$Fe_2@(9,9)_2$	1,00	6,17	3,09	3,09	0,002	0,002	-0,007
Fe_2	1,00		3,11	3,11	0	0	

метр u отклонения атомов от оси цепочки существенно уменьшается, но цепочка может сохранять зигзагообразную форму. Этому случаю соответствует удвоение элементарной ячейки НТ вдоль c -оси с новой постоянной решетки $2c_0 = 4,9190 \text{ Å}$. Таким образом, количество атомов углерода в элементарной ячейке увеличилось в два раза, а количество атомов железа осталось прежним, т.е. 2. В этом случае (рис. 5) оптимизация по c слабо меняет энергию связи и только для небольших радиусов инкапсулированных НТ, что отражает уменьшение плотности атомов железа на единицу длины НТ.

В табл. 2 приведены результаты неэмпирического расчета оптимизированных НТ $Fe_2@(n,n)_2$. Для всех новых структур магнитные моменты атомов Fe больше, а отклонения атомов Fe от оси НТ u существенно меньше, чем в аналогичных случаях, рассмотренных ранее. Только в структуре $Fe_2@(4,4)_2$ относительно небольшой магнитный момент железа. Магнитные моменты атомов Fe остальных НТ $Fe_2@(n,n)_2$ очень близки к магнитным моментам атомов Fe свободной цепочки «зигзаг». Отклонения атомов Fe от оси НТ становятся незначительными, начиная со структуры $Fe_2@(6,6)_2$. Практически это переход от цепочки атомов «зигзаг» к линейной цепочке атомов.

Плотность d -состояний Fe для всех исследуемых структур $Fe_2@(n,n)_2$ представлена на рис. 6. Только для соединения $Fe_2@(4,4)_2$ актуальна гибридизация состояний углерода и Fe.

Заключение

В рамках теории функционала плотности были проведены неэмпирические расчеты структурных, электронных и магнитных свойств углеродной НТ «кресло», инкапсулированных цепочкой атомов Fe «зигзаг» $Fe_2@(n,n)_m$ ($m = 1, 2; n = 4, 5, 6, 7, 8, 9$). Расчеты показали, что оптимизация структуры вдоль оси НТ может существенно изменять энергию связи НТ и цепочки атомов Fe. Так, для $Fe_2@(5,5)$ энергия связи изменяется в 2 раза, от $-0,062 \text{ эВ}$ до $-0,124 \text{ эВ}$.

В зависимости от степени заполнения НТ «кресло» (5,5) и (6,6) атомами Fe энергия связи может быть как положительной, так и отрицательной. То есть варьируя степень заполнения НТ атомами железа, можно получать связанные состояния.

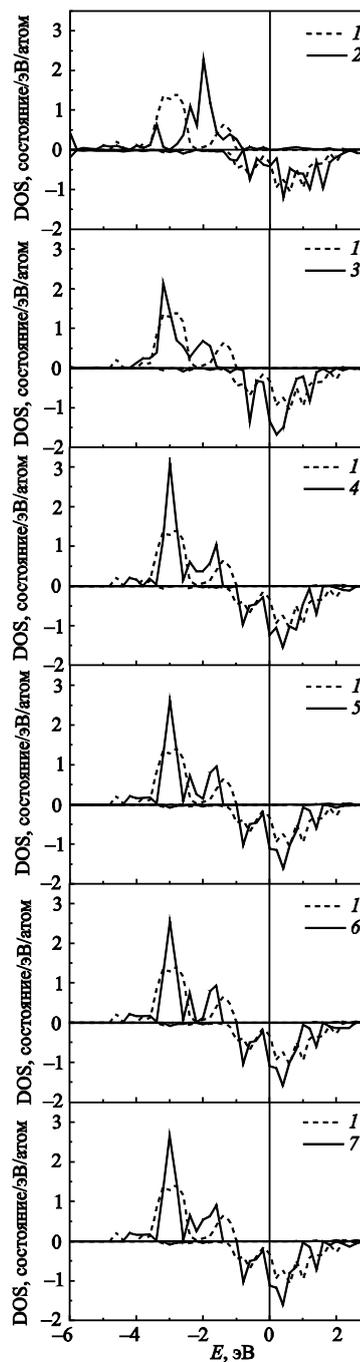


Рис. 6. Полная плотность d -состояний атома Fe в различных структурах: 1 — Fe_2 ; 2 — $Fe_2@(4,4)_2$; 3 — $Fe_2@(5,5)_2$; 4 — $Fe_2@(6,6)_2$; 5 — $Fe_2@(7,7)_2$; 6 — $Fe_2@(8,8)_2$; 7 — $Fe_2@(9,9)_2$.

При больших радиусах инкапсулированной НТ ($> 4,13 \text{ \AA}$) энергия связи НТ и цепочки атомов Fe стремится к нулю, а магнитные моменты атомов Fe и отклонения атомов Fe от оси НТ стремятся к значениям аналогичных величин в свободной цепочке атомов Fe «зигзаг».

Работа посвящается нашему учителю Кириллу Борисовичу Толпыго. Возможность работать вместе с ним, слушать его лекции, выступления на семинарах, просто общаться, была щедрым подарком нашей судьбы. Энциклопедическая эрудиция, феноменальная интуиция, логическое и притом парадоксальное мышление, «лица необщее выражение» отличали Кирилла Борисовича.

1. K. Svensson, H. Olin, and E. Olsson, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 145901 (2004).
2. N.Y. Jin-Phillipp and M. Puhle, *Phys. Rev. B* **70**, 245421 (2004).
3. П.Н. Дьячков, *Электронные свойства и применение нанотрубок*, БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва (2011).
4. J.H. Warner, M.H. Rummeli, A. Bachmatiak, and B. Büchner, *Phys. Rev. B* **81**, 155419 (2010).
5. C. Guerret-Piécourt, Y. Le Bouar, A. Loiseau, and H. Pascard, *Nature* **372**, 761 (1994).
6. G.E. Grechnev, V.A. Desnenko, A.V. Fedorchenko, A.S. Panfilov, L.Yu. Matruj, Yu.I. Prylutskyu, M.I. Grybova, U. Ritter, P. Scharff, and Yu.A. Kolesnichenko, *Fiz. Nizk. Temp.* **36**, 1347 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 1086 (2010)].
7. S. Karmakar, S.M. Sharma, P.V. Teredesai, and A.K. Sood, *Phys. Rev. B* **69**, 165414 (2010).
8. M.N. Ou, T.J. Yang, and Y.Y. Chen, *Chin. J. Phys.* **47**, 848 (2009).
9. Т.А. Лень, Л.Ю. Мацуй, И.В. Овсиенко, Ю.И. Прилуцкий, В.В. Андриевский, И.Б. Беркутов, Г.Е. Гречнев, Ю.А. Колесниченко, *ФНТ* **37**, 1086 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 1027 (2011)].
10. A. Briones-Leon, P. Ayala, X. Liu, K. Yanagi, E. Weschke, M. Eisterer, H. Jiang, H. Kataura, T. Pichler, and H. Shiozawa, *Phys. Rev. B* **87**, 195435 (2013).
11. B. Hope and A. Horsfield, *Phys. Rev. B* **77**, 094442, (2008).
12. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю.Г. Пашкевич, *ФНТ* **38**, 1433 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 1129 (2012)].
13. M. Zeleny, M. Sob, and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **79**, 134421 (2009).
14. T. Shimada, Y. Ishii, and T. Kitamura, *Phys. Rev. B* **84**, 174405 (2011).
15. S.J. Luo, G.Y. Cuo, and Laref, *J. Phys. Chem.* **113**, 14615 (2009).
16. J.C. Tung and G.Y. Guo, *Comp. Phys. Commun.* **182**, 84 (2011).
17. Y.J. Kang, J. Choi, C.Y. Moon, and K.J. Chang, *Phys. Rev. B* **71**, 115441 (2005).
18. Y.J. Kang and K.J. Chang, *Physica B* **376–377**, 311 (2006).
19. E.M. Diniz, R.W. Nunes, H. Chacham, and M.S.C. Mazzoni, *Phys. Rev. B* **81**, 153413 (2010).
20. M. Weissmann, G. Garsia, M. Kiwi, R. Ramirez, and C.C. Eu, *Phys. Rev. B* **73**, 125435, (2006).
21. Y. Xie, J.M. Zhang, and Y.P. Huo, *Eur. Phys. J. B* **81**, 459 (2011).
22. V.V. Ivanovskaya, C. Köhler, and G. Seifert, *Phys. Rev. B* **75**, 075410 (2007).
23. S.F. Wang, Y. Zhang, L.Y. Chen, J.M. Zhang, and K.W. Xu, *Phys. Status Solidi A* **208**, 97 (2011).
24. Y.R. Jang and J.I. Lee, *Phys. Status Solidi B* **244**, 4407 (2007).
25. Y. Sun, X. Yang, and J. Ni, *Phys. Rev. B* **76**, 035407 (2007).
26. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю. Г. Пашкевич, *ФНТ* **40**, 699 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 542 (2014)].
27. J. Kazerovskis, S. Piskunov, Y.F. Zhukovskii, P.N. D'yachkov, and S. Bellucci, *Chem. Phys. Lett.* **577**, 92 (2013).
28. J.C. Tung and G.Y. Guo, *Phys. Rev. B* **76**, 094413 (2007).
29. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
30. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **48**, 13115 (1993).
31. J.P. Perdew, S. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).

Incapulation of “armchair”-type nanotubes by the “zigzag” Fe atoms chains

V.G. Boutko, A.A. Gusev, T.N. Shevtsova, and Yu.G. Pashkevich

Ab initio calculations of structural, electronic and magnetic properties of “chair” carbon nanotubes $\text{Fe}_2@(n,n)_m$ ($m = 1, 2; n = 4, 5, 6, 7, 8, 9$) (NT) encapsulated by zigzag Fe atom chain were performed in the density functional theory framework. It is shown, that the structural optimization along NT axis may essentially change the binding energy of NT and Fe atom chain. It follows from calculations, that $\text{Fe}_2@(5,5)$ is the most stable among all investigated encapsulated nanotubes. Reducing the Fe concentration in encapsulated NT in two time converts system from exothermic to endothermic one ($\text{Fe}_2@(5,5)_m$) and vice versa ($\text{Fe}_2@(6,6)_m$). At the large radii of encapsulated NT ($> 4,13 \text{ \AA}$) the binding energy of NT and Fe atom chain tends to zero, also the Fe atoms magnetic moments and Fe atom deviations from NT axis tends to similar values for free zigzag Fe atom chain.

PACS: 71.20.Tx Fullerenes and related materials; intercalation compounds;

73.22.-f Electronic structure of nanoscale materials and related systems;

61.48.De Structure of carbon nanotubes, boron nanotubes, and other related systems.

Keywords: electronic structures, carbon nanotube “armchair”, encapsulation, “zigzag” Fe atom chain, binding energy, magnetic moment of Fe.